科 学 通 报
第38卷 第2期 CHINESE SCIENCE BULLETIN 1993年1月

含源汇非定常对流扩散问题紧致四阶差分格式

杨 志 峰
(北京师范大学环境科学研究所水环境模拟国家重点实验室，北京 100875)

陈 国 谦
(中国科学院力学研究所，北京 100080)

关键词 对流扩散、紧致差分、综合变换、非定常、计算流体力学

对流扩散乃流体流动与传热传质的基本过程. 作为提高其数值模拟可靠性的根本途径，对流扩散方程的高精度数值方法愈受重视[1-9]. 其中紧致差分 (compact difference) 以其实用、省时和高整体精度等特性倍受青睐[4-9]. Dennis[5] 四阶紧致格式，一维情况可推广至非定常问题，但处理较繁；更为遗憾地是其格式未能充分反应对流的"迎风"效应，不适用于对流占优问题[6]. 新近发展的摄动四阶紧致差分格式[6,7]可以确保对流的迎风性，相当程度上克服了 Dennis 格式中的上述困扰，目前尚待推广于非定常问题. 杨志峰等[8]发展了非定常对流扩散方程四阶紧致差分格式，时间单步、空间仅含相邻结点(即三点式)，取得了较为满意的成果. 未失一般性，在应用于非线性对流或含有源汇问题时，亦不能确保具原有较高精度[8,10-12]. 杨志峰等[10-12]曾以含源扩散方程和泊松方程为例，发展了对源汇项的离散化方法，从而保证了非齐次方程差分格式亦可具有其齐次方程差分格式的精度[10-12]. 鉴于此，本文进一步完成如下工作.

1 对流的综合变换

一维含源汇非定常对流扩散问题一般数学描述为

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}+U(x,t)\frac{\partial \phi}{\partial x}=D\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}+S(x,t), \tag{1}$$

其中 ϕ 为待求量，U、S 分别为对流流速和源汇函数，这里为 x、t 的函数，D 是扩散系数.

$\phi=U$, $D=$ 运动粘性系数 ν 时，式(1)为非线性对流扩散 (Burgers) 方程，通常视为流体流动 (Navier-Stokes 方程)的模型方程.

$\phi=$ 污染浓度，$U=$ const. 时，式(1)为线性的含源对流扩散方程，在具有污染源的大气、地表水和地下水环境及化工流动等领域中经常涉及.

兹设

$$\phi(x,t)=\theta(x,t)\psi(x)\varphi(t), \tag{2}$$

1992-05-20 收稿，1992-09-18 收修改稿.

代入方程(1)得

$$\phi\left(\varphi\frac{\partial\theta}{\partial t}+\theta\frac{d\varphi}{dt}\right)+U\varphi\left(\phi\frac{\partial\theta}{\partial x}+\theta\frac{d\phi}{dx}\right)$$

$$=D\varphi\left(\phi\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2}+2\frac{\partial\theta}{\partial x}\frac{d\phi}{dx}+\theta\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)+S, \tag{3}$$

欲消除关于θ的对流因子和反应项,须令

$$U\phi=2D\frac{d\phi}{dx}, \tag{4}$$

$$\phi\frac{d\varphi}{dt}+U\varphi\frac{d\phi}{dx}=D\varphi\frac{d^2\phi}{dx^2}, \tag{5}$$

这样方程(3)简化为

$$\frac{\partial\theta}{\partial t}=D\frac{\partial^2\theta}{\partial x^2}+F(x,t), \tag{6}$$

这里

$$F(x,t)=\phi^{-1}\varphi^{-1}S. \tag{7}$$

我们称式(6)为对流扩散方程(1)的等价扩散方程,θ即为等价扩散变量.

由式(4)得

$$\phi(x)=\exp\left[\frac{1}{2}\int\frac{U}{D}dx\right], \tag{8}$$

代人式(5)有

$$\varphi(t)=\exp\left[\frac{1}{2}\int\left(\frac{\partial U}{\partial x}-\frac{D}{2}\left(\frac{U}{D}\right)^2\right)dt\right]. \tag{9}$$

我们称 $\phi(x)\varphi(t)$ 为非定常对流扩散方程(1)的综合变换,其中 $\phi(x)$ 为对流的"迎风"函数、$\varphi(t)$ 为对流的"历经"函数. 变换 $\phi(x)\varphi(t)$ 将对流扩散型方程(1)变换为等价扩散型方程(6),较难处理的对流项不再出现,其作用转嫁给变换函数.故而通过式(6)来间接获取对流扩散量的高阶算式要比直接由式(1)建立对流扩散量的高阶算式方便和简易.

2 四阶紧致差分格式

杨志峰等[10,11]发展了形如式(6)含源汇扩散方程四阶二层三点差分格式:

$$2(6r+5)\theta_i=(6r-1)(\theta_{i-1}+\theta_{i+1})+2(5-6r)\theta_i^0$$

$$+(6r+1)(\theta_{i-1}^0+\theta_{i+1}^0)+C_FF_i+\delta F_i, \tag{10}$$

式中下标i表示差分点号,上标^{0}表示上一时段; $r=D\tau/h^2$, 其中τ、h为时、空步长; C_F为源项差分系数,δ_F为高阶修正量[10],具体可描述为

$$C_F=12rh^2, \tag{11}$$

$$\delta F_i=(6r+1)\tau h^2\left(\frac{\partial^2F}{\partial x^2}\right)_i-6\tau^2\left(\frac{\partial F}{\partial t}+D\frac{\partial^2F}{\partial x^2}\right)_i. \tag{12}$$

在差分子域内,ϕ、φ可定积分表示为

$$\phi(\zeta)=\exp\left[\frac{1}{2}\int_0^\zeta\frac{U}{D}dx\right], \tag{13}$$

$$\varphi(\eta)=\exp\left[\frac{1}{4}\int_\eta^0\left(\frac{U^2}{D}-2\frac{\partial U}{\partial x}\right)dt\right], \tag{14}$$

这里 ζ、η 为差分子域内空间和时间局部坐标，$\zeta\in[-h,h]$、$\eta\in[-\tau,0]$.

据式(2)、(13)和(14)，以 $\theta(\zeta,\eta)=\phi(\zeta,\eta)\psi^{-1}(\zeta)\varphi^{-1}(\eta)=\phi(\zeta,\eta)\psi(-\zeta)\varphi(-\eta)$ 及式(7)代人式(10)—(12)，可得对流扩散方程(1)的相应差分格式:

$$C_i\phi_i=C_{i-1}\phi_{i-1}+C_{i+1}\phi_{i+1}+C_i^0\phi_i^0+C_{i-1}^0\phi_{i-1}^0+C_{i+1}^0\phi_{i+1}^0+C_sC_i+\delta S_i, \tag{15}$$

其中

$$C_i=2(6r+5), \tag{16.1}$$
$$C_{i-1}=(6r-1)\psi(h), \tag{16.2}$$
$$C_{i+1}=(6r-1)\psi(-h), \tag{16.3}$$
$$C_i^0=2(5-6r)\varphi(\tau), \tag{16.4}$$
$$C_{i-1}^0=(6r+1)\psi(h)\varphi(\tau), \tag{16.5}$$
$$C_{i+1}^0=(6r+1)\psi(-h)\varphi(\tau), \tag{16.6}$$
$$C_s=12rh^2, \tag{16.7}$$
$$\delta S_i=\frac{r}{D}h^4\left\{(1-2r)\left[\left(\frac{\partial^2S}{\partial x^2}\right)_i-\frac{U_i}{D}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)_i\right]-\frac{6r}{D}\left(\frac{\partial S}{\partial t}\right)_i+(1-6r)\left[\left(\frac{U_i}{2D}\right)^2-\frac{1}{2D}\left(\frac{\partial U}{\partial x}\right)_i\right]S_i\right\}. \tag{16.8}$$

显然,差分格式充分地体现了对流的"迎风"效应和"历经"效应: 上游的贡献恒大于下游贡献，随之 $|U|$ 的增加，上游贡献 (C_{i-1}、C_{i-1}^0, $U>0$; C_{i+1}、C_{i+1}^0, $U<0$) 加大，下游的减小且渐趋于零,此乃对流"迎风"效应实质;同时,时间步长愈大,上时段贡献 (C_i^0、C_{i-1}^0 和 C_{i+1}^0) 亦愈小，此所谓"历经"效应使然. 故而，差分格式确保了差分解与微分解的定性相符. 此外，$S=0$ 时，ϕ 与 $\phi+\text{const.}$ 均为方程(1)的解，差分方程(15)亦反应这一特性,就要求差分系数满足关系式:

$$C_i=C_{i-1}+C_{i+1}+C_i^0+C_{i-1}^0+C_{i+1}^0. \tag{17}$$

为对离散所带来偏差有所纠正[13],我们以式(17)取代式(16.1),即系数 C_i 确定为

$$C_i=(6r-1)[\psi(h)+\psi(-h)]+2(5-6r)\varphi(\tau)+(6r+1)\varphi(\tau)[\psi(h)+\psi(-h)]. \tag{18}$$

差分方程(15)的等价微分方程为

$$\frac{\partial\phi}{\partial t}+U\frac{\partial\phi}{\partial x}=D\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}+S+O\left(\sum_{i=0}^{3}h^{2i}\tau^{2-i}\right). \tag{19}$$

可见差分格式具有 $O\left(\sum_{i=0}^{3}h^{2i}\tau^{2-i}\right)$ 阶精度，$\tau=O(h^2)$ 时,精度四阶 $O(h^4)$.

3 格式的稳定性

采用 Fourier 分析方法,对任一 k 波型 Fourier 分量,格式(15)的扰动误差放大系数

$$G=\frac{C_i^0+C_{i-1}^0e^{-ikh}+C_{i+1}^0e^{ikh}}{C_i-C_{i-1}e^{-ikh}-C_{i+1}e^{ikh}}. \tag{20}$$

考虑到式(17)或(18)，G 之模 $|G|\leqslant 1$ 恒成立,故格式具有无条件稳定性.

4 算 例

构造 $\frac{\partial \phi}{\partial t}+\frac{\partial \phi}{\partial x}=\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}-e^{x-t}$ $(0<x<1,\ t>0)$ 其解析值 $\phi=e^{x-t}$ 以求对格式进行基本数值验证;为比较有据,同时选用现流行一阶迎风格式为参考. 表1给出了不同网格最大计算误差 Max $(\phi_{计算}-\phi_{解析})$ 随时间的变化,显然本文格式绝对优越,相同条件下两种格式误差相差600或6000倍左右. 表1亦列出了对格式精度数值检验的结果;据差分理论,对空间四阶(时间二阶)格式,空间网格缩小一倍(时间网格四倍),其误差应减小 $2^4(4^2)=16$ 倍;而本文格式的减小了20倍左右(见表1),充分反映了四阶格式精度特性; 参考格式仅一阶精度,故相同条件下其误差仅缩小2倍. 另从表1中亦可看出,本文格式粗网格的结果亦明显优于参考格式细网格下的值,故而本文格式实现了较粗网格下获得较高精度数值解.

表1 最大计算误差变化

时间 t	本文格式	参考格式	本文格式	参考格式	本文格式	参考格式
	$h=0.2,\ \tau=0.04$		$h=0.1,\ \tau=0.01$		误差缩小倍数	
0.04	0.116825×10^{-4}	0.628221×10^{-2}	0.550313×10^{-6}	0.320045×10^{2}	21.2	1.96
0.20	0.281333×10^{-4}	0.159469×10^{-1}	0.131130×10^{-5}	0.810062×10^{-2}	21.4	1.97
0.40	0.267028×10^{-4}	0.157628×10^{-1}	0.143051×10^{-5}	0.773775×10^{-2}	18.7	2.03
0.60	0.222921×10^{-4}	0.133615×10^{-1}	0.953674×10^{-6}	0.648498×10^{-2}	23.3	2.06
0.80	0.184774×10^{-4}	0.110164×10^{-1}	0.894069×10^{-6}	0.532972×10^{-2}	20.6	2.06
1.00	0.150799×10^{-4}	0.903242×10^{-2}	0.715255×10^{-6}	0.436633×10^{-2}	21.0	2.06
1.20	0.122785×10^{-4}	0.739729×10^{-2}	0.596046×10^{-6}	0.357532×10^{-2}	20.6	2.06
1.40	0.100433×10^{-4}	0.605675×10^{-2}	0.506639×10^{-6}	0.292721×10^{-2}	19.8	2.07
1.60	0.819563×10^{-5}	0.495889×10^{-2}	0.447034×10^{-6}	0.239664×10^{-2}	18.3	2.07
1.80	0.673532×10^{-5}	0.406006×10^{-2}	0.327825×10^{-6}	0.196215×10^{-2}	20.5	2.07
2.00	0.551343×10^{-5}	0.332406×10^{-2}	0.268220×10^{-6}	0.160649×10^{-2}	20.5	2.07

致谢 承蒙北京大学吴江航教授支持和指导,对此不胜感激。

参 考 文 献

[1] Rai, M. M., *AIAA Paper* 87-0543, 1987.
[2] Roger, S. E., Kwak, D., *AIAA J.*, 1990, 28(2): 253—262.
[3] Yang, G. L. *et al.*, *Int. J. Num. Meth. in Fluids*, 1991, 12(1): 43—58.
[4] Hirsh, R. S., *J. Comp. Phys.*, 1975, 19(1): 90—109.
[5] Dennis, S. C. R., Hundson, J. D., *J. Comp. Phys.*, 1989, 85(2): 390—416.
[6] 陈国谦、杨志峰,中国博士后论文集,北京大学出版社,北京,1991,(4): 132—141.
[7] 陈国谦、杨志峰、高智,计算物理,1991,8(4): 132—141.
[8] 杨志峰、周雪漪、许协庆,水动力学研究与进展,1991,6(1): 113—119.
[9] 杨志峰、陈国谦、罗朝俊,中国博士后论文集,北京大学出版社,北京,1991,(4): 99—104.
[10] 杨志峰、周同明,北京师范大学学报(自然科学版),1992,28(1): 124—128.
[11] 杨志峰、陈国谦,北京师范大学学报(自然科学版),1992,28(3): 315—316.
[12] 杨志峰、许协庆,水动力学研究与进展,1992,7(3): 262—268.
[13] 陈国谦、高智,力学学报,1991,23(4): 418—425.